



TITLE:

遷移金属(特にNi)の表面磁性(「表面電子系の理論」報告,基研短期研究会)

AUTHOR(S):

高山, 一

---

CITATION:

高山, 一. 遷移金属(特にNi)の表面磁性(「表面電子系の理論」報告,基研短期研究会). 物性研究 1976, 26(3): C24-C27

ISSUE DATE:

1976-06-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89199>

RIGHT:

## 電界イオン分光と電子スピン偏極 による表面電子状態の研究

内 海 孝 雄

FIM の像解釈に物性論的意味付のため FI によるイオンの運動量分析を W(100), (110) 面及び同  $N_2$  吸着面につき行った結果、通常では困難な<sup>2)</sup>表面電子密度分布測定が可能ながことが判明し同法を FES にならって FIS と名付けた。3d 金属の電界放射電子の ESP 測定は高真空電界蒸発法の導入により  $Ni$  清浄面の放射電子を対称性補正型モット検出器で行った。 $Ni$  (100) 周辺近傍, (013), 及び (112) 面でそれぞれ  $P = +1.28, +3.58$  並に  $-2.90$  を得た。同結果は  $Ni$  の s 及び d 状態のトンネル確率比を考えれば、多体効果を含む  $Ni$  バンドモデルと矛盾しない。

FIS : Field Ionization Spectroscopy

FI : Field Ionization

FES : Field Emission Spectroscopy

FE : Field Emission

FIM : Field Ion Microscopy

P : Degree of Polarization

## 遷移金属 (特に $Ni$ ) の表面磁性

北大理 高 山 一

触媒作用の顕著な遷移金属の表面物性の一部として、その磁氣的性質にも最近興味もたれている。ここでは特に (1) 表面磁化の有無, (2) 存在する場合の磁化容易軸方向 (表面磁気異方性)<sup>1)</sup> について定性的な議論を試みた。

バルクでのストーナー理論に、表面近傍の不均一性を含めることにより表面磁性が議論できるとすれば、問題は表面での 3d 電子状態の解析に帰着する。常磁性状態での表面電子状態については既に詳細な計算がなされている。<sup>2)</sup> ここでは、それと同等な計算

を強磁性状態で行うのではなく、むしろそれを行う以前の問題として、表面の対称性の破れに起因する諸性質が表面磁性に及ぼす特徴的効果を定性的な議論で調べる。特に、これら諸性質のうち Ref. (2) にも含まれていない表面近傍での結晶場効果が強調される。

バルク金属内では、結晶場効果（立方結晶では、 $e_g$  - 軌道と  $t_{2g}$  - 軌道の分離）は電子のホッピング項より充分小さい。しかし表面では電荷分布の対称性の破れが大きく5個の3d-軌道に対するポテンシャルの違いは大きいであろう。例えばNiの(001)面において = 以下の議論はこの系に限る = 面内の  $d_{xy}$  - 軌道は表面の存在をそれ程感じないであろうが、真空に飛び出した部分（表面のダングリングボンド）をもつ  $d_{xz}$  - 軌道への表面効果は大きい。このポテンシャルの違いを表面での結晶場分離と呼ぶことにする。その具体的大きさをきちんと見積る方法は現在のところまだないが、Fuldeらは<sup>3)</sup>バルクのバンド計算で開発された renormalized atom approach を表面問題にも適用し、上述  $d_{xy}$  - 軌道は  $d_{yz}$  - 軌道よりエネルギーが高く、その分離は1 eV 程にもなり得るとした。彼らはまたこのNi(001)表面上では3dのホール数が1原子当り0.1 ~ 0.2 と見積った。具体的な数値に関しては問題が残るとしても、以下の結論は定性的に妥当と考えられる。即ち、このNi表面では3d - ホールの数はバルクのそれよりも小さく、そのホールは  $d_{xy}$  の異方性を持つ。このことから前記設問(1)については、ホールの存在する  $d_{xy}$  - バンドのみに関する1バンド近似が、定性的な議論のための第0次の近似として妥当であること、 $d_{xy}$  の異方性が設問(2)に関して重要な役割を占めること等が言える。

1 バンド近似の範囲で、ストナー理論に表面による系の不均一性を取り入れることは容易で、問題を磁性体中の磁性不純物の磁化の議論に類似させることができる（表面では、ポテンシャルとクーロン積分がバルクのそれと異なるとすれば、表面のNiが不純物と見なせる）。ここでの興味ある結果は（詳細はRef. (3, 4)）、(i) 表面でのホール数が1原子当り0.1 ~ 0.2 以上で表面磁化に対する方程式は3つの解をもつ。そのうち二つは表面磁化がバルク磁化と平行及び反平行になるもので、残り一つは表面常磁性状態に対応する。(ii) エネルギーを比較すると、常磁性状態はその極大になっている。二つの極小については、ホール数が増す程、表面磁化が反平行の状態がエネルギー的に低くなるが、そのエネルギー差は  $10^2$  °K しかなく、有限温度では大きなゆらぎ効

果が期待される。(iii)  $N_i$  に対する設問 (1) の答は、そのホール数がクリティカルな領域にあり、結論は出せない。

そこで次に、 $N_i$  (001) 面で表面磁化が存在するとして、表面磁気異方性の振舞いを調べてみる。これは西ドイツの Fulde, Bohnen 両氏と共同して現在進行中の計算である。遷移金属における磁気異方性の起因はスピン-軌道相互作用  $H_{so}$  にある。表面の対称性の破れから、この異方性エネルギーは  $H_{so}$  の 2 次摂動から有限にでてくることを Bennett-Cooper<sup>5)</sup> は示した。我々の目的は、この種の量についても前述の結晶場効果の重要性を指摘することにある。計算の詳細を略してその要点だけを以下に示す。

$i$ -軌道にホールがあり、これと  $j$ -軌道が  $H_{so}$  で相互作用しているとき、 $i$ -軌道からの異方性エネルギーへの寄与は、大ざっぱに言って、 $(i\text{-軌道のホール数}) \times (j\text{-軌道の交換エネルギー分離}) \times (i\text{-}, j\text{-軌道電子エネルギー分散の差})^{-1}$  に比例する。ここで最終項は 2 次摂動計算に現われる通常のエネルギー分母に対応する。この量に対して結晶場効果は次のように効いてくる。(i)  $i$ -軌道としては  $d_{xy}$ -軌道だけである。(前述の解析からは、やはり表面の層内にある  $d_{x^2-y^2}$ -軌道にもホールが存在し得るが、この場合に拡張しても異方性に関する結果は定性的に同じになる) (ii)  $j$ -軌道の交換エネルギー分離は小さい。(iii) エネルギー分母の変化。これらの事情のため、結晶場効果を考慮すると、表面でのホールの異方性を決めた要因(表面での対称性の破れ)がそのまま磁気異方性を決める最大の要因になっていることが解かる。結晶場効果を含めなくても、表面でのホールが主に  $d_{xy}$ -異方性をもつことが結論されるが、<sup>2)</sup> (i) 以下の事情が異なるので、異方性エネルギーには各軌道電子のエネルギー分散の違いが複雑にからみ合ってきて、定性的な議論では済まなくなる。この結果は、結晶場効果が表面での対称性の破れに起因する効果を高めるのに重要な役割を果していることを示す。尚、計算の結果では、表面に  $0.2 \mu_B$  の磁化がある場合、これを表面に垂直に向けようとする異方性エネルギーが存在し、その大きさは  $0.1 \sim 0.2 \text{ erg/cm}^2$  程になる。

#### 参 考 文 献

- 1) U. Gradmann, Appl. Phys. 3, 161 (1974)
- 2) M. C. Desjonquères and F. Cyrot-Lackmann, J. Phys. (Paris) 36, L-45 (1975)
- K. Terakura and I. Terakura, J. Phys. Soc. Japan 39, 356 (1975)

- 3) P. Fulde, A. Luther, and R. E. Watson, Phys. Rev. **B8**, 440 (1973)
- 4) H. Takayama, K. Baker, and P. Fulde, Phys. Rev. **B10**, 2022 (1974)
- 5) A. J. Bennett and B. R. Cooper, Phys. Rev. **B3**, 1642 (1971).

## 磁性体の界面とスピン波

神戸大・理 利 根 川 孝

図1に示すような(100)面を界面として接している体心立方強磁性体と体心立方反強磁性体とを考える。強磁性領域及び反強磁性領域の界面に平行な面の番号を界面から順にそれぞれ  $p = 0, 1, 2, \dots$  及び  $p = -1, -2, -3, \dots$  ととる。この系におけるスピン波の状態を調べるのが本研究の目的である。

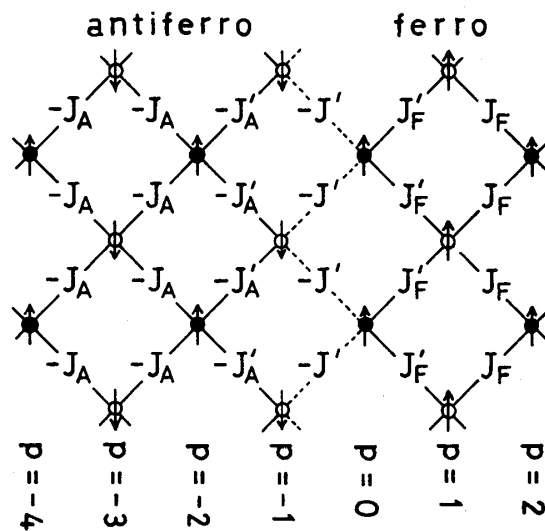


図 1